第 38 卷第 4 期 工 程 热 物 理 学 报 Vol.38, No.4
2017 年 4 月 JOURNAL OF ENGINEERING THERMOPHYSICS Apr., 2017

固定接触角蒸发液滴内 Marangoni 对流数值模拟

唐 甜[1] 石万元[1,2]

(1. 重庆大学动力工程学院，重庆 400044；
2. 重庆大学低品位能源利用技术及系统教育部重点实验室，重庆 400044)

摘 要 考虑蒸发冷却效应、气相物质扩散、气液两相传热及界面变形，采用任意拉格朗日–欧拉法数值模拟研究了接触角 θ、蒸发数 Ec、Ma 数对 0.65cSt 硅油液滴固定接触角模型蒸发及 Marangoni 对流的影响。发现：液滴无量纲体积 V^* 变化与接触角 θ、Ma 数有关，而与 Ec 数无关；且 $V^{*2/3}$ 随时间线性减少。当 $\theta < 0.175$ rad 时，随着 Ma 数的升高，液滴内部依次出现热毛细涡流结构、单个 BM 涡流结构及多个 BM 涡流结构。当 0.175 rad$< \theta < 0.479$ rad 时，存在热毛细涡流结构或多个 BM 涡流结构或两种同时存在，而无单个 BM 涡流结构。当 $\theta > 0.479$ rad 时，仅存在热毛细涡流结构。当 0.105 rad$< \theta < 0.401$ rad 时，每两种涡流结构的分界 Ma 数均随 θ 增大而减少。当 $\theta > 0.401$ rad 时，热毛细涡流结构与多个 BM 涡流结构的分界 Ma 数随 θ 增大而增大。

关键词 液滴蒸发；两相传热；界面变形；Marangoni 对流
中图分类号：TK123 **文献标识码**：A **文章编号**：0253–231X(2017)04–0792–08

Marangoni Convection in Evaporating Sessile Droplet With Constant Angle by Numerical Simulation

TANG Tian[1] SHI Wan-Yuan[1,2]

(1. *College of Power Engineering, Chongqing University, Chongqing* 400044, *China;*
2. *Key Laboratory of Low-grade Energy Utilization Technologies and Systems, Ministry of Education, Chongqing* 400044, *China*)

Abstract Taking into account of evaporation cooling, mass diffusion, two-phase heat transfer and gas-liquid interface deformation, the evaporation of a droplet of 0.65cSt silicone oil with constant contact angle on a heated substrate is numerically investigated using Arbitrary Lagrangian-Eulerian method. The effects of contact angle θ, evaporation number Ec and Marangoni number Ma on the evaporation and the Marangoni convection are analyzed. Numerical results find that the variation of volume V^* is affected by θ and Ma but not by Ec, and the $V^{*2/3}$ varies with t^* linearly. With increasing Ma, the thermocapillary convection, single-vortex Bénard-Marangoni convection (BM convection) and multiple-vortex BM convection appear in sequence for $\theta < 0.175$ rad. Thermocapillary convection or multiple-vortex BM convection or both of them occur for 0.175 rad$< \theta < 0.479$ rad but without single-vortex Bénard-Marangoni convection. Only thermocapillary convection appears for $\theta > 0.479$ rad. The neutral Ma between two kinds of vortex convection decreases with increasing contact angle for 0.105 rad$< \theta < 0.401$ rad, while it increases for $\theta > 0.401$ rad.

Key words evaporating droplet; two-phase heat transfer; interface deformation; Marangoni convection

0 引 言

液滴蒸发在工程实际中的运用十分普遍，例如：相变冷却技术 [1]、喷雾薄膜涂层工艺 [2]、打印着色工艺 [3]、DNA 芯片制造 [4]、DNA 分子调整及拉伸 [5]、血液沉积疾病诊断技术 [6] 等。由于液滴为弧形表面，导致液滴表面总存在切向和法向温度梯度。切向温度梯度引起热毛细对流，足够大的法向温度梯度引起 Bénard-Marangoni 对流 (即 BM 对流)，文献中不加区分时两者均称为 Marangoni 对流。

液滴蒸发及其内部 Marangoni 对流的研究大多集中于固定接触线模型 (CR 模型) [7−9]，包括液滴蒸发过程的质量变化 (蒸发率)、几何形变 (接触角、液滴高度、体积)、沉积现象、表面温度以及 Marangoni

收稿日期：2016-08-19; **修订日期**：2017-03-20
基金项目：国家自然科学基金项目 (No.51676018)
作者简介：唐 甜 (1990–)，男，硕士研究生，主要从事传热传质方面的研究。 **通信作者**：石万元，教授，Email：shiwy@cqu.edu.cn

对流及其失稳等。其中文献 [9] 采用归一化法研究了几何形变、液滴寿命与润湿半径、基底温度、环境湿度的关系。实际上，由于基底表面特性不同，液滴蒸发除了 CR 模型外，还有接触角保持不变的情况 [10]，即固定接触角模型 (CA 模型)，而目前对 CA 模型下液滴蒸发及其内部 Marangoni 对流的研究相对较少。已有研究主要采用理论和实验的方法，研究了液滴质量 [11−13]、液滴体积 [13] 变化规律及热流体波 (失稳的热毛细对流) 的波数与初始液滴几何尺寸、时间的关系 [14]。在 “one-side” 模型下，文献 [15] 给出了 Bénard-Marangoni 对流模拟结果，但并没有深入研究。

为此，本文采用任意拉格朗日－欧拉法，数值模拟固定接触角模型情况下加热平面上蒸发液滴内 Marangoni 对流，主要分析接触角 θ、Ec 数、Ma 数对它的影响。研究对理解固定接触角蒸发液滴内部流动和传热特征具有指导意义。

1 数学物理模型

1.1 物理模型

物理模型如图 1 所示，液滴初始形状为球冠形，初始润湿半径 R_c = 2.5 mm，接触角 θ = 0.105 ～ 0.524 rad; 基底长度为 1.5R_c，气相区域半径为 65R_c。模拟考虑蒸发冷却效应、气相物质扩散、气液两相流动及蒸发引起的界面变形。气、液两相工质分别为空气、0.65cSt 硅油，其物性参数如表 1 所示。

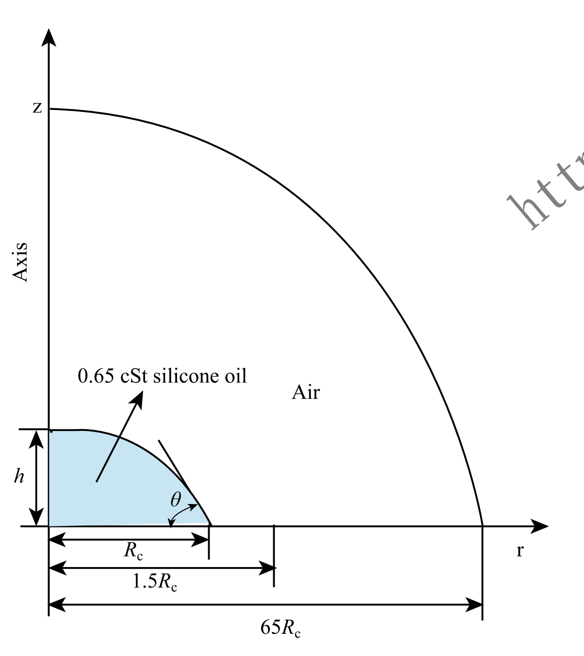


图 1　基底上液滴蒸发物理模型

Fig. 1　Schematic model of evaporating liquid droplet on a flat substrate

表 1　25 °C 时 0.65cSt 硅油、空气的物性参数 [16]

Table 1　Physical properties of 0.65cSt silicone oil and air at 25 °C [16]

参数	0.65cSt 硅油	空气
密度 $\rho/(\mathrm{kg/m^3})$	760	1.18
动力黏度 $\mu/((\mathrm{N\cdot s})/\mathrm{m^2})$	4.94×10^{-4}	1.83×10^{-5}
导热系数 $\lambda/(\mathrm{W/(m\cdot K)})$	0.1	0.01
比热容 $c_p/(\mathrm{J/(kg\cdot K)})$	2000	1004
表面张力系数 $\sigma/(\mathrm{N/m})$	1.52×10^{-2}	–
表面张力温度系数 $\sigma_\mathrm{T}/(\mathrm{N/(m\cdot K)})$	9×10^{-5}	–
蒸发潜热 $H_\mathrm{t}/(\mathrm{J/kg})$	2.23×10^5	–
浓度扩散系数 $D/(\mathrm{m^2\cdot s})$	5.60×10^{-6}	–

1.2 数学模型及计算方法

模型采用轴对称模型，基本假设包括：液滴初始形状为球冠形；除表面张力随温度变化以外，其余物性参数均为常数；基底表面为等温边界条件；表面张力在流体流动中占主导作用 ($Bo \sim 0.01$)，忽略重力的作用；气液界面蒸汽浓度为饱和浓度；气、液两相流体均为不可压缩流体。考虑到 VOF 法难以计算变形较大的问题、而 Level Set 法不满足质量守恒，本文借鉴文献 [17] 的计算方法，采用任意拉格朗日–欧拉方法 (ALE) 追踪气液界面变形。

1.2.1 无量纲控制方程

质量守恒方程：

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u}^{*}=0 \tag{1}$$

动量守恒方程：

液相：

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}^{*}}{\partial t^{*}}+\left(\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}^{*} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{u}^{*}=-\nabla p^{*} \boldsymbol{I}+\frac{1}{Re_{\mathrm{l}}} \nabla^{2} \boldsymbol{u}^{*} \tag{2-1}$$

气相：

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}^{*}}{\partial t^{*}}+\left(\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}^{*} \cdot \nabla\right) \boldsymbol{u}^{*}=-\frac{1}{\rho_{\mathrm{g}}^{*}} \nabla p^{*} \boldsymbol{I}+\frac{1}{Re_{\mathrm{g}}} \nabla^{2} \boldsymbol{u}^{*} \tag{2-2}$$

能量守恒方程：

液相：

$$\frac{\partial T^{*}}{\partial t^{*}}+\left(\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}^{*} \cdot \nabla\right) T^{*}=\frac{1}{Pe_{\mathrm{Tl}}} \nabla^{2} T^{*} \tag{3-1}$$

气相：

$$\frac{\partial T^{*}}{\partial t^{*}}+\left(\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}^{*} \cdot \nabla\right) T^{*}=\frac{1}{Pe_{\mathrm{Tg}}} \nabla^{2} T^{*} \tag{3-2}$$

气相扩散方程：

$$\frac{\partial c^{*}}{\partial t^{*}}+\left(\boldsymbol{u}_{\mathrm{c}}^{*} \cdot \nabla\right) c^{*}=\frac{1}{Pe_{\mathrm{D}}} \nabla^{2} c^{*} \tag{4}$$

其中 $\boldsymbol{u}_{\rm c}^*$ 为流体流动速度与网格移动速度之差：$\boldsymbol{u}_{\rm c}^* = \boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{u}_{\rm mesh}^*$。

1.2.2 边界条件

1) 流动边界条件

a) 对称轴采用对称边界条件

液相：

$$\boldsymbol{u}^* \cdot \boldsymbol{n}=0, \left[-p^*\boldsymbol{I} + \frac{1}{Re_{\rm l}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right] \cdot \boldsymbol{n} = 0 \tag{5-1}$$

气相：

$$\boldsymbol{u}^* \cdot \boldsymbol{n}=0, \left[-p^*\boldsymbol{I} + \frac{\rho_{\rm g}^*}{Re_{\rm g}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right] \cdot \boldsymbol{n} = 0 \tag{5-2}$$

b) 气液界面力平衡条件

法向方向：

$$\left[-p^*\boldsymbol{I}+\frac{\rho_{\rm g}^*}{Re_{\rm g}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right]_{\rm g} : \boldsymbol{nn}=\left[-p^*\boldsymbol{I} + \frac{1}{Re_{\rm l}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right]_{\rm l} : \boldsymbol{nn}+ \left(\frac{1}{Ca \cdot Re_{\rm l}} - \frac{Ma_{T_{\rm w}}}{Re_{\rm l}^2 \cdot Pr_{\rm l}}(T^* - T_0^*)\right) k^* \tag{6-1}$$

切向方向：

$$\left[-p^*\boldsymbol{I}+\frac{\rho_{\rm g}^*}{Re_{\rm g}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right]_{\rm g} : \boldsymbol{nt}=\left[-p^*\boldsymbol{I} + \frac{1}{Re_{\rm l}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right]_{\rm l} : \boldsymbol{nt}+ \left(-\frac{Ma_{T_{\rm w}}}{Re_{\rm l}^2 \cdot Pr_{\rm l}}\right) \nabla_{\rm s} T^* \cdot \boldsymbol{t} \tag{6-2}$$

气液界面质量流量与气液相速度关系 [19]：

$$(\boldsymbol{u}_{\rm lg-g}^* - \boldsymbol{u}_{\rm lg-l}^*) \cdot \boldsymbol{n} = \left(\frac{1}{\rho_{\rm g}^*} - 1\right)(\boldsymbol{n} \cdot \nabla c^*) \tag{7}$$

其中，“：”为张量双点积运算符，“$\boldsymbol{n}$”和“$\boldsymbol{t}$”代表界面外法向单位向量和切向单位向量，“$\boldsymbol{nn}$”、“$\boldsymbol{nt}$”为它们的并矢。曲率 $k^* = R_{\rm c}/r_{\rm c}$，$r_{\rm c}$ 为曲率半径。

c) 液固、气固界面采用 Naver-slip 滑移边界条件

液固界面：

$$\left[-p^*\boldsymbol{I} + \frac{1}{Re_{\rm l}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right]_{\rm l} : \boldsymbol{nt} = -\frac{1}{Re_{\rm l}}\frac{\boldsymbol{u}^*}{\beta^*} \cdot \boldsymbol{t} \tag{8-1}$$

气固界面：

$$\left[-p^*\boldsymbol{I} + \frac{1}{Re_{\rm g}}\nabla \boldsymbol{u}^*\right]_{\rm l} : \boldsymbol{nt} = -\frac{1}{Re_{\rm g}}\frac{\boldsymbol{u}^*}{\beta^*} \cdot \boldsymbol{t} \tag{8-2}$$

其中，$\beta^*=\beta/R_{\rm c}$ 为无量纲滑移长度，β 为滑移长度。

d) 气相外边界采用定压边界条件

$$p_\infty^* = 0 \tag{9}$$

2) 传热边界条件

a) 对称轴采用对称边界条件

$$-\boldsymbol{n} \cdot (\nabla T^*) = 0 \tag{10}$$

b) 气液界面能量平衡边界条件

$$\boldsymbol{n} \cdot \left[\left(\lambda_{\rm g}^* \nabla T^*\right)_{\rm g} - (\nabla T^*)_{\rm l}\right] = Ec\,(-\boldsymbol{n} \cdot (-\nabla c^*)) \tag{11}$$

c) 气相外边界采用恒温边界条件

$$T_\infty^* = 0 \tag{12}$$

d) 基底采用等温边界条件

$$T_{\rm w}^* = 1 \tag{13}$$

3) 气相的浓度边界条件

a) 对称轴采用对称边界条件

$$-\boldsymbol{n} \cdot (-\nabla c^*) = 0 \tag{14}$$

b) 气液界面采用饱和浓度边界条件

$$c_{\rm lg-g}^* = \frac{c_{\rm lg-g} - c_\infty}{c_{\rm sat} - c_\infty} \tag{15}$$

c) 气相外边界采用恒定浓度边界条件

$$c_\infty^* = 0 \tag{16}$$

d) r 轴上采用无通量边界条件

$$-\boldsymbol{n} \cdot (-\nabla c^*) = 0 \tag{17}$$

1.2.3 初始条件

$$\boldsymbol{u}_{\rm t=0}^* = 0, \quad p_{\rm t=0}^* = 0, \quad T_{\rm t=0}^* = 0, \quad c_{\rm t=0}^* = 0 \tag{18}$$

方程中几何尺寸、速度、时间、压力、密度、黏度、导热系数的无量纲尺度分别为 $R_{\rm c}$、$\boldsymbol{u}_{\rm e}$、$R_{\rm c}/\boldsymbol{u}_{\rm e}$、$\rho_{\rm l}\boldsymbol{u}_{\rm e}^2$、$\rho_{\rm l}$、$\mu_{\rm l}$、$\lambda_{\rm l}$，其中 $\boldsymbol{u}_{\rm e} = 2\pi MD(c_{\rm sat} - c_\infty)/\rho_{\rm l}R_{\rm c}$。无量纲温度定义为 $T^* = (T - T_\infty)/(T_{\rm w} - T_\infty)$，无量纲浓度定义为 $c^* = (c - c_\infty)/(c_{\rm sat} - c_\infty)$；下标 s、lg-l、lg-g、l、g、w、$\infty$ 分别表示气液界面、界面液相侧、界面气相侧、液相、气相、基底、气相外边界；浓度 $c_{\rm sat}$、c_∞ 满足理想气体状态方程 $c_{\rm sat} = p_{\rm sat}/(RT)$、$c_\infty = p_{\rm sat} \cdot R_{\rm H}/(RT)$；压力 $p_{\rm sat}$ (单位 kPa) 是通过安托尼方程 [16] $\lg(p_{\rm sat}) = A - B/(T + C)$ 得到；其中 $A = 7.07406$、$B = 1657.46$、$C = -46.13$。

无量纲特征参数定义为：雷诺数 $Re = \boldsymbol{u}_\mathrm{e}R_\mathrm{c}/(\mu/\rho)$，普朗特数 $Pr = \mu c_p/\lambda$，传热佩克莱数 $Pe_\mathrm{T} = RePr = \boldsymbol{u}_\mathrm{e}R_\mathrm{c}/(\lambda/\rho c_p)$，表示对流传热与扩散传热之比，扩散佩克莱数 $Pe_\mathrm{D} = \boldsymbol{u}_\mathrm{e}R_\mathrm{c}/D$，表示对流传质与扩散传质之比，毛细数 $Ca = \mu\boldsymbol{u}_\mathrm{e}/\sigma$，马兰戈尼数 $Ma = \sigma_\mathrm{T}(T_\mathrm{w} - T_\infty)R_\mathrm{c}/(\mu_\mathrm{l}\lambda_\mathrm{l}/\rho_\mathrm{l}c_{p,\mathrm{l}})$，蒸发数 $Ec = H_\mathrm{t}MD(c_\mathrm{sat} - c_\infty)/(T_\mathrm{w} - T_\infty)\lambda_\mathrm{l}$，表示蒸发散热与扩散传热之比。$M$ 为摩尔质量，D 为扩散系数，$R_\mathrm{H} = c_\infty/c_\mathrm{sat}$ 为气相外边界相对浓度，R 为气体常数，H_t 为气化潜热，σ 为表面张力系数，σ_T 为表面张力温度系数。

2 网格无关性检验

为了选择合适的计算网格，选用网格尺寸为 7.5 μm、9 μm、10 μm、12.5 μm 四种网格进行计算。其中液相网格采用上述四种网格尺寸构成的均匀网格；气相网格尺寸由气液界面处网格尺寸向气相外边界以 1.15 倍的增长率逐渐增长，最大网格不超过 1000 μm。计算 180 s 后液滴润湿半径及表面平均温度结果如表 2 所示，四种网格的计算结果相差很小，考虑计算时间和精度影响，后续计算选取尺寸 9 μm 的网格。

表 2　网格无关性验证，润湿半径 $R_\mathrm{c} = 2.5$ mm

Table 2　Mesh dependency for the droplet with $R_\mathrm{c} = 2.5$ mm

液相网格/μm	润湿半径 r/μm	r 相对误差%	表面平均温度/°C	平均温度相对误差%
7.5	1858.60	–	29.44	–
9	1864.66	0.33	29.44	0.0034
10	1865.05	0.02	29.44	0.0034
12.5	1869.18	0.22	29.44	0.014

在验证模型的准确性时，采用上述 9 μm 网格模拟文献 [18] 中悬垂半球形 0.65cSt 硅油液滴顶点温度变化。图 2 为本文模拟结果与文献结果比较，最大相对误差 2.4%出现在初始阶段，误差较小，说明目前采用的计算是正确的。

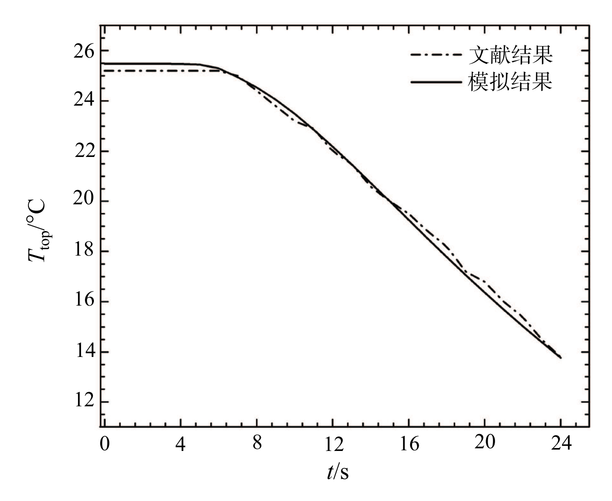


图 2　模拟的液滴顶点温度与文献 [18] 对比结果

Fig. 2　Comparison of apex temperatures of droplet between reference result[18] and present simulation result

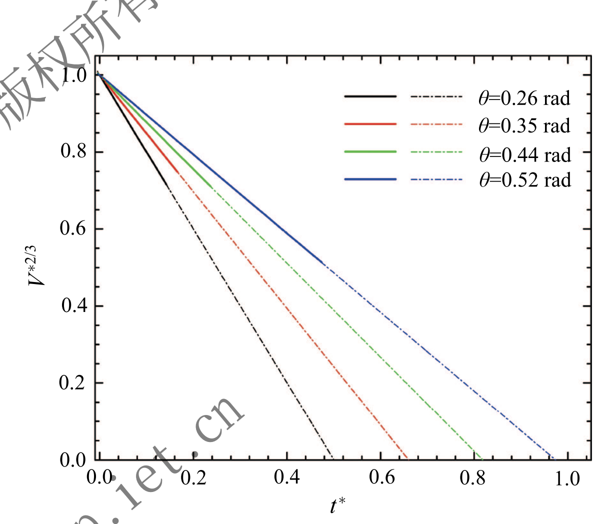


图 3　不同接触角下液滴蒸发过程 $V^{*2/3}$ 随时间 t^* 的变化

Fig. 3　Time evolution of droplet volume $V^{*2/3}$ for different angles (rad)

3 结果与分析

3.1 液滴蒸发过程及其影响因素

如图 3 所示，实线为模拟的液滴体积变化，虚线为拟合曲线。液滴体积 V^* 的 2/3 次方随时间线性减小，这与文献 [11]~[13] 的理论与实验研究结果趋势一致。且接触角 θ 越小，其无量纲蒸发寿命越短 (如图，当 $V^{*2/3} = 0$ 时，θ 从小到大对应的 t^* 分别为 0.50、0.66、0.82、0.97)。

通过对适用于 CA、CR 模型的理论公式 [11] $M_\theta = 2\pi f(\theta)D(c_\mathrm{sat}(T_\mathrm{lg}) - c_\infty)r$ 进行分析，发现液滴体积变化受三方面的影响：1) 接触角 θ，$f(\theta)$ [13] 随 θ 减小而减小；2) 润湿半径 r，润湿半径 r 随蒸发的进行逐渐减小；3) 浓度 $c_\mathrm{sat}(T_\mathrm{lg})$($c_\infty$ 不变时)，安托尼方程 [16] 揭示浓度 $c_\mathrm{sat}(T_\mathrm{lg})$ 与表面平均温度呈正相关关系，而表面平均温度在蒸发过程中变化相对缓慢。分析这些因素发现，相同蒸发条件 (Ec 数、Ma 数相同) 下，液滴体积变化主要受液滴几何形变 (θ、r) 的影响。

根据 1.2 节中无量纲特征数的定义，Ec 数随 R_H 的增大而减小 (即：外边界浓度 c_∞ 增加，浓度差 $c_\mathrm{sat}(T_\mathrm{w}) - c_\infty$ 减小，蒸发冷却效应减弱)，Ma 数随 T_w 增大而增大。模拟中通过改变 R_H、T_w 来研究 Ec

数、Ma 数对液滴无量纲体积变化的影响，发现两者的影响 (如图 4) 与固定接触线模型有一定的差异。在 CR 模型 [9] 下，Ec 数、Ma 数对液滴无量纲体积变化无影响。而对 CA 模型，虽然 Ec 数对液滴无量纲体积的变化无明显的影响，但 Ma 越大，液滴无量纲体积变化越慢 (无量纲蒸发寿命越长)。这是因为随着 Ma 数增大，液滴蒸发的时间尺度越小 (图 4 中 Ma 由小到大对应的时间尺度分别为：597.04 s、422.09 s、312.42 s、238.68 s)；同时液滴内部流动、温度分布也随之发生变化 (如图 6 所示)。

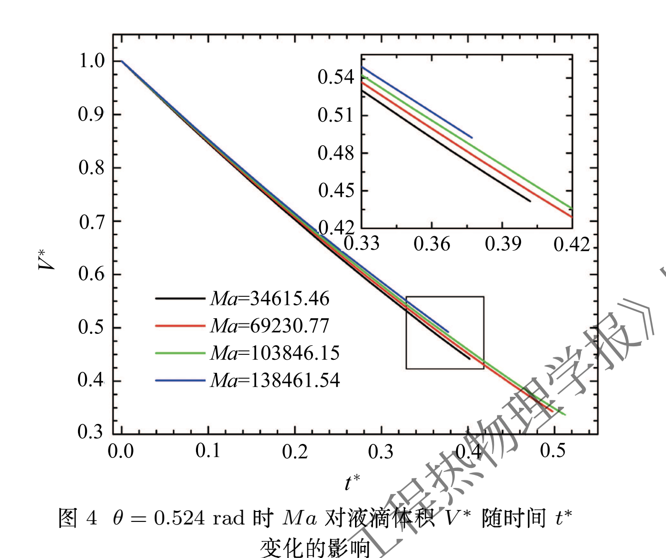


图 4 $\theta=0.524$ rad 时 Ma 对液滴体积 V^* 随时间 t^* 变化的影响

Fig. 4 The effects of Ma on the evolution of droplet volume V^* with constant angle $\theta=0.524$ rad

3.2 液滴内 Marangoni 对流

如图 5(a) 所示，在相同的 Ma 数下，当接触角 $\theta=0.524$ rad 时，液滴内部存在单个热毛细涡流，表面流动沿三相接触线向顶点流动，表面温度随流动方向逐渐降低。当接触角 $\theta=0.262$ rad 时，液滴内部中心区域存在两个 BM 涡流，如图 5(b) 所示，这两个 BM 涡流在三维空间上组成一个 BM 涡胞；而表面最高温度一直在三相接触线处，因此在液滴边缘始终存在由三相接触线向液滴顶点流动的热毛细涡流。热毛细涡流与 BM 涡流间存在局部冷点，而 BM 涡流之间存在局部热点。另外，在 Marangoni 对流作用下，液滴内部等温线发生了弯曲；且存在 BM 涡流结构的液滴其等温线弯曲更加严重，说明对流更强。

在蒸发前期，液滴内部流动由热毛细对流逐渐转变为 BM 对流，且中心处 BM 涡流强度比靠近热毛细对流的 BM 涡流更强、涡胞尺寸更大，如图 6 所示。当 $Ma=34615.46$，直到 $t^*=1.67\times10^{-2}$ 时液滴内部热毛细涡流与 BM 涡流的分布才趋于相对稳定，而 $Ma=138461.54$，$t^*=3.35\times10^{-3}$ 时内部涡流结构已相对稳定。因此 Ma 数越大，液滴内热毛细涡流与 BM 涡流达到相对稳定的时间越短；且中心处的 BM 对流占据液滴内部的空间越大。

除了蒸发过程的影响外，Ma 数也会对液滴内部涡流结构产生影响，如图 7 所示。$Ma=5.54\times10^3$ 时，液滴内部形成单个逆时针流动的热毛细涡流结构；$Ma=9.00\times10^3$ 时液滴内部出现单个 BM 涡流，其流动方向与热毛细涡流流动方向相反 (顺时针方向)，并与对称轴另一侧的 BM 涡流结构形成一个 BM 涡胞；$Ma=1.73\times10^4$ 时，液滴中心区出现两个 BM 涡流结构，两者形成一个 BM 涡胞结构，且

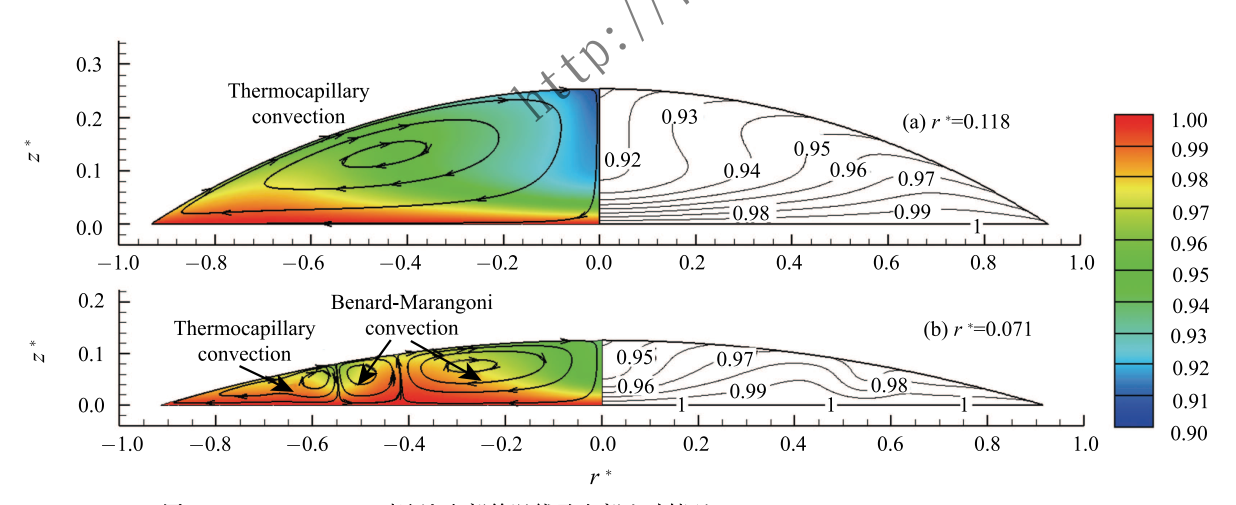


图 5 $Ma=69230.77$ 时液滴内部等温线及内部流动情况 (a) $\theta=0.524$ rad、(b) $\theta=0.262$ rad

Fig. 5 The temperature field, streamlines and isotherm temperature lines for Ma =69230.77. (a) θ=0.524 rad, (b) θ=0.262 rad

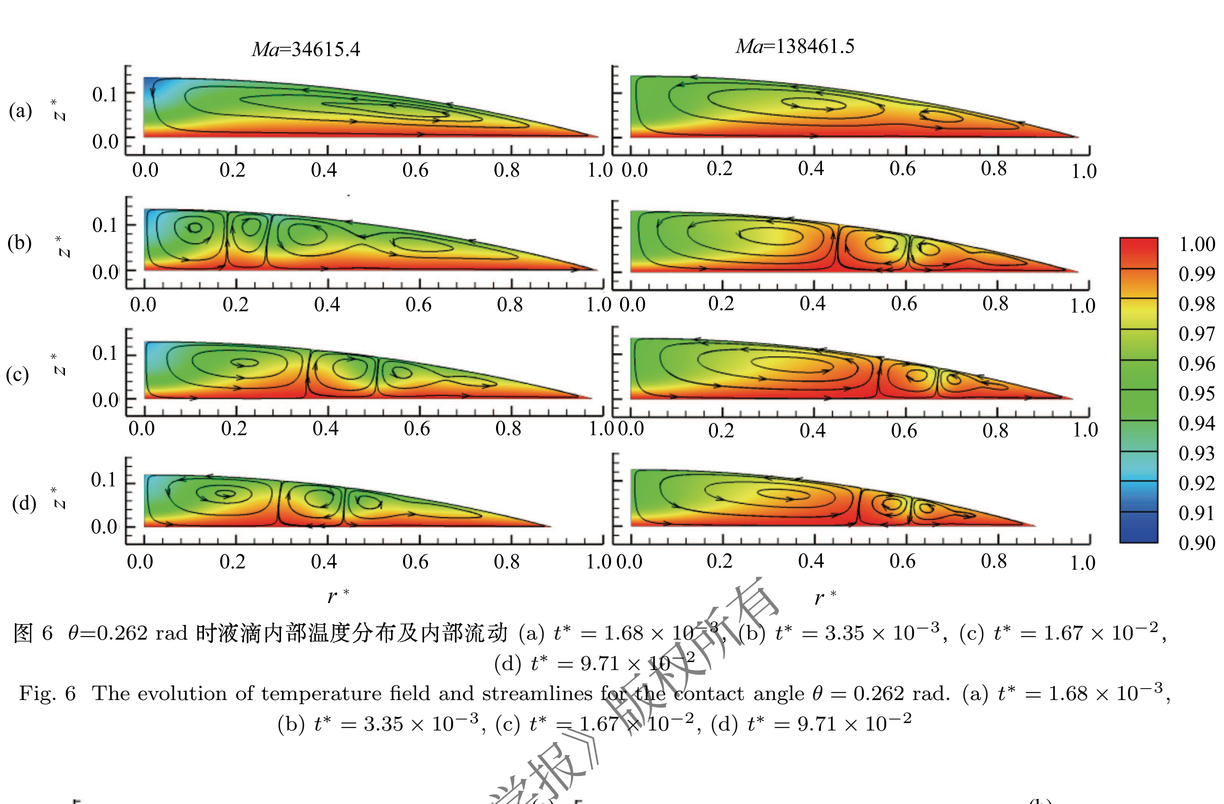


图 6　θ=0.262 rad 时液滴内部温度分布及内部流动 (a) $t^*=1.68\times10^{-3}$, (b) $t^*=3.35\times10^{-3}$, (c) $t^*=1.67\times10^{-2}$, (d) $t^*=9.71\times10^{-2}$

Fig. 6　The evolution of temperature field and streamlines for the contact angle $\theta=0.262$ rad. (a) $t^*=1.68\times10^{-3}$, (b) $t^*=3.35\times10^{-3}$, (c) $t^*=1.67\times10^{-2}$, (d) $t^*=9.71\times10^{-2}$

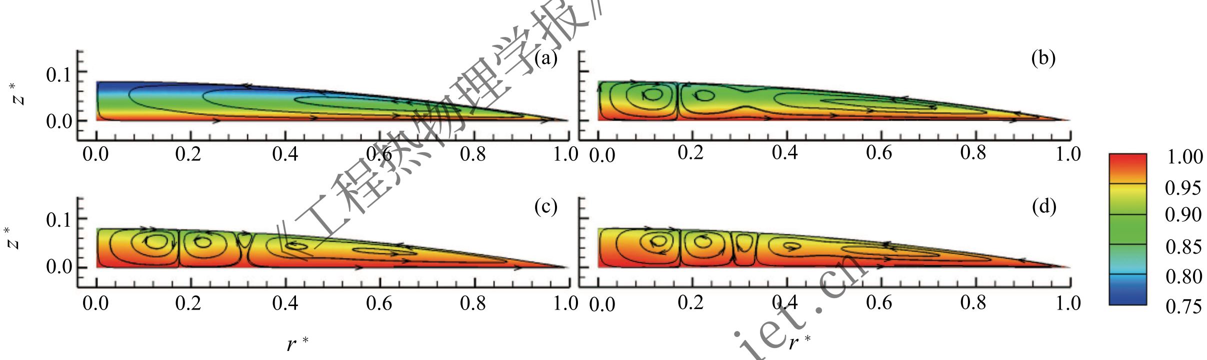


图 7　接触角 $\theta=0.157$ rad 时液滴内部温度分布及内部流动情况 (a) $Ma=5.54\times10^3$, (b) $Ma=9.00\times10^3$, (c) $Ma=1.73\times10^4$, (d) $Ma=2.08\times10^4$

Fig. 7　The evolution of temperature field, streamlines with constant angel $\theta=0.157$ rad. (a) $Ma=5.54\times10^3$, (b) $Ma=9.00\times10^3$, (c) $Ma=1.73\times10^4$, (d) $Ma=2.08\times10^4$

在液滴腰部形成新的小涡流。$Ma=2.08\times10^4$ 时，液滴内部出现三个 BM 涡流，其中靠近热毛细对流的 BM 涡流的流动方向为顺时针，而 BM 涡流之间相互耦合流动。

由于液滴为弯曲界面，液滴内必然同时存在法向温度梯度和切向温度梯度。只要存在切向温度梯度，就会产生热毛细对流。所以，当 Ma 数较小时，液滴内以热毛细对流为主。当 Ma 数足够大，对应的法向温度梯度超过 BM 对流失稳的临界条件时，BM 对流就会产生。相比热毛细对流，BM 对流走过的路径较短，传热效率高，因此，随着 Ma 数的进一步增大，BM 对流逐渐占据主导，表现为 BM 对流涡胞数逐渐增多，而热毛细对流所占的区域相应缩小。

为了分析接触角对液滴内 Marangoni 对流稳定性的影响，本文通过一系列的计算，确定了不同接触角下 Marangoni 对流结构之间的分界 Ma 数，如图 8 所示。

接触角介于 0.105~0.524 rad 之间，存在三种不同的涡流结构，即：热毛细涡流结构、单个 BM 涡流结构及多个 BM 涡流结构。当接触角为 0.105~0.175 rad 时，在同一接触角下，随着 Ma 数的升高，液滴内部依次出现热毛细涡流结构、单个 BM 涡流结构及多个 BM 涡流结构三种对流结构；当接触角为 0.175~0.279 rad 时，液滴内部仅存在多个 BM 涡流结构；当接触角大于 0.279~0.401 rad 时，液滴内部依次出现多个 BM 涡流、热毛细涡流及多个 BM 涡

流两种对流结构，而不会产生单个 BM 涡流结构；当接触角为 0.401∼ 0.479 rad 时，在同一接触角下，随着 Ma 数的升高，液滴内部依次出现热毛细涡流、多个 BM 涡流两种对流结构；当接触角大于 0.479 rad 时，液滴内部仅存在热毛细涡流对流结构。当接触角为 0.175∼0.401 rad 时，即使在很小 Ma 数下液滴内部也会产生多个 BM 涡流结构，因此蒸发冷却效应可以诱导 BM 涡流结构的产生。

图 8 中黑色线为单个热毛细涡流结构与单个 BM 涡流结构的分界线，红色线为单个 BM 涡流结构与多个 BM 涡流结构的分界线，蓝色线与绿色线为热毛细涡流对流结构与多个 BM 涡流结构的分界线。黑色线与红色线的分界 Ma 数随接触角增大逐渐减小，这是因为随着接触角的增大，液滴的厚度增加，液滴内流体受到基板的黏滞力相对减小，同时液滴内部导热减弱而液滴蒸发冷却效应增强，即使在相同的基板温度下，液滴内 Marangoni 对流也更强。因此，随着接触角的增大，分界 Ma 数逐渐减小。类似地，蓝色线与 0.279∼0.401 rad 之间的绿色线均随接触角的增大而减小。当接触角介于 0.401∼0.479 rad 之间时，液滴厚度进一步增加，热毛细对流占主导作用，由于热毛细对流的流动方向与相邻的 BM 对流涡流的流动方向相反，它对 BM 涡流的产生具有抑制作用，因而此时产生多个 BM 涡流结构的分界 Ma 数随接触角的增大而增大。

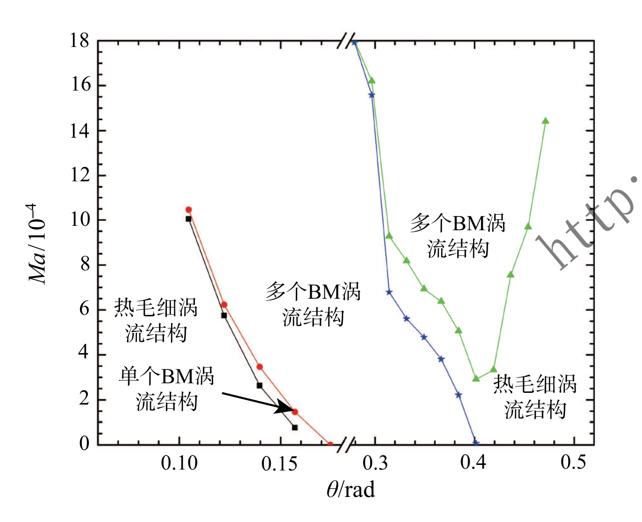


图 8 三种 Marangoni 涡流结构之间的分界 Ma 数

Fig. 8 The Ma number for onset of different kinds of Marangoni convection modes versus the contact angle

4 结 论

在考虑液滴蒸发冷却效应、气相物质扩散、气液两相传热、气液界面变形情况下，数值模拟研究了固定接触角模型下液滴蒸发过程中气液两相流动，分析了接触角 θ、Ec 数、Ma 数对液滴蒸发过程的影响，重点研究了液滴内部 Marangoni 对流失稳现象。得到以下结论：

1) 相同润湿半径下，接触角 θ 越小，液滴蒸发寿命越短；且体积的 2/3 次方随时间线性减少。相同接触角下，Ec 数对液滴蒸发寿命 (液滴体积) 无明显影响；而 Ma 数越大，液滴无量纲蒸发寿命越长。

2) 当接触角为 0.105∼0.175 rad，随着 Ma 数的升高，液滴内部依次出现热毛细涡流结构、单个 BM 涡流结构及多个 BM 涡流结构。当接触角为 0.175∼0.279 rad，液滴内部仅存在多个 BM 涡流结构。当接触角介于 0.279∼0.479 rad 之间时，液滴内部存在热毛细涡流结构、多个 BM 涡流结构。当接触角大于 0.479 rad 时，液滴内部仅存在热毛细涡流结构。

3) 当接触角为 0.105∼0.401 rad 时，热毛细涡流结构与单个 BM 涡流结构、单个 BM 涡流结构与多个 BM 涡流结构、热毛细涡流结构与多个 BM 涡流结构之间的分界 Ma 数随接触角增大而减少。当接触角大于 0.401 rad 时，热毛细涡流结构与多个 BM 涡流结构之间的分界 Ma 数随接触角增大而增大。

参 考 文 献

[1] Bar-Cohen A, Arik M, Ohadi M, et al. Direct Liquid Cooling of High Flux Micro and Nano Electronic Components [J]. Proceedings of the IEEE, 2006, 94(8): 1529–1570

[2] Karlsson S, Rasmuson A, Björn I N, et al. Characterization and Mathematical Modelling of Single Fluidised Particle Coating [J]. Powder Technology, 2011, 207(1): 245–254

[3] Sirringhaus H, Kawase T, Friend R H, et al. High-resolution Inkjet Printing of All-polymer Transistor Circuits [J]. Science, 2000, 290(5299): 2123–2126

[4] Dugas V, Broutin J, Souteyrand E. Droplet Evaporation Study Applied to DNA Chip Manufacturing [J]. Langmuir, 2005, 21(20): 9130–9136

[5] Chopra M, Li L, Hu H, et al. DNA Molecular Configurations in an Evaporating Droplet Near a Glass Surface [J]. Journal of Rheology, 2003, 47(5): 1111–1132

[6] Sefiane K. On the Formation of Regular Patterns From Drying Droplets and Their Potential Use For Bio-Medical Applications [J]. Journal of Bionic Engineering, 2010, 7: S82—S93

[7] David S, Sefiane K, Tadrist L, et al. Experimental Investigation of the Effect of Thermal Properties of the Substrate in the Wetting and Evaporation of Sessile Drops [J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2007, 298(1): 108–114

[8] 任泽霈，张能力，罗锐. 平板上蒸发液滴内表面张力作用下流动的研究 [J]. 工程热物理学报，1987, 8(4): 370–373

Ren Zepei, Zhang Nengli, Luo Rui. Flows Driven by Surface Tension in Droplet on a Plate [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 1987, 8(4): 370–373

[9] Hu D, Wu H. Numerical Study and Predictions of Evolution Behaviors of Evaporating Pinned Droplets Based on a Comprehensive Model [J]. International Journal of Thermal Sciences, 2015, 96: 149–159

[10] Bourges-Monnier C, Shanahan M E R. Influence of Evaporation on Contact Angle [J]. Langmuir, 1995, 11(7): 2820–2829

[11] Picknett R G, Bexon R. The Evaporation of Sessile or Pendant Drops in Still Air [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1977, 61(2): 336–350

[12] Cazabat A M, Guéna G. Evaporation of Macroscopic Sessile Droplets [J]. Soft Matter, 2010, 6(12): 2591–2612

[13] Erbil H Y, Mchale G, Newton M I, et al. Drop Evaporation on Solid Surfaces: Constant Contact Angle Mode [J]. Langmuir, 2002, 18(7): 2636–2641

[14] Sobac B, Brutin D. Thermocapillary Instabilities in an Evaporating Drop Deposited onto a Heated Substrate [J]. Physics of Fluids, 2012, 24(3): 032103

[15] Karapetsas G, Valluri P, Sefiane K, et al. Convective Rolls and Hydrothermal Waves in Evaporating Sessile Drops [J]. Langmuir, 2011, 28(31): 11433–11439

[16] Sáenz P J, Valluri P, Sefiane K, et al. On Phase Change in Marangoni-driven Flows and Its Effects on the Hydrothermal-wave Instabilities [J]. Physics of Fluids, 2014, 26(2): 024114

[17] Yang Kai, Hong Fangjun, Cheng Ping. A Fully Coupled Numerical Simulation of Sessile Droplet Evaporation Using Arbitrary Lagrangian–Eulerian Formulation [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2014, 70: 409–420

[18] Savino R, Fico S. Transient Marangoni Convection in Hanging Evaporating Drops [J]. Physics of Fluids, 2004, 16(10): 3738–3752

[19] Scardovelli R, Zaleski S. Direct Numerical Simulation of Free-Surface and Interfacial Flow [J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2003, 31(1): 567–603